



TITLE:

電荷密度波の運動に伴う非線形電気伝導(非線形揺動と秩序化過程, 科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

高山, 一; 松川, 宏

CITATION:

高山, 一 ...[et al]. 電荷密度波の運動に伴う非線形電気伝導(非線形揺動と秩序化過程, 科研費研究会報告). 物性研究 1986, 45(6): 1-4

ISSUE DATE:

1986-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91914>

RIGHT:

電荷密度波の運動に伴う非線形電気伝導

京大基研, 北大理* 高山一, 松川 宏*

NbSe_3 などの擬1次元導体と呼ばれる一連の物質において、波数 $Q=2k_F$ (注: フェルミ波数) の格子変位と、同じ波数をもつ電荷密度波 (CDW) とが共存した、パイエルス状態がある転移温度以下で出現する。波数ベクトルは擬1次元方向を向き、これをx軸にとれば $\text{CDW } \rho(x)$ は

$$\rho(x) = \rho_0 + \rho_1 \cos\{Qx + \phi(x)\} \quad (1)$$

と表わされる (ρ_0, ρ_1 は平均電荷密度と CDW の振幅)。パイエルス転移を起したバンドのフェルミ準位にはギャップが付き、1電子的には絶縁体状態になる。しかし、外からかかる電場 E を増大させて行くと、あるしきい値電場 E_T を越えた途端、電気伝導度が増加し始め、十分 E を大きくするとパイエルス転移を起こさなかったときと同等の大きさ程度まで伝導度が回復する。関連する実験事実を総合すると¹⁾、この非線形電気伝導現象は、相転移で生じた巨視的な凝縮体であるところの CDW が全体として並進運動することによるものと理解される。即ち、 $E < E_T$ では CDW は不純物などにピン止めされ、直流伝導には寄与しないが、 $E > E_T$ では電場の力がピン止め力を上回るためピン止めがはずれ (ディピンニング)、CDW が動き出し、直流伝導に寄与する。

不純物は物質中で不規則に分布している。個々の不純物ポテンシャルが強いと CDW の波の打ち方、数学的には(1)式の位相因子 $\phi(x)$ の値は、各不純物ポテンシャルエネルギーを最も得するように決まる (強いピン止め)。従って CDW (の位相) の空間相関長さ ξ_0 は平均不純物間距離 d_{imp} となる。不純物ポテンシャルが弱いときは多数の不純物による効果が合わさって CDW に対してピン止め力を発揮する (弱いピン止め)。その機構は福山-Lee-Rice (以下 FLR) によって明らかにされたが²⁾、この場合の ξ_0 ($\equiv \xi_{\text{FLR}}$) も d_{imp} よりはるかに大きいものの有限である。従って、CDW のディピンニング機構として、 ξ_0 程度の大きさをもつ CDW の部分がピン止め力の弱いところから順次動き始める過程が予想されるが、それでは非線形伝導度 $\sigma(E)$ の E_T における急激な立ち上りを説明できない。実験事実は E_T において巨視的 (試料とほぼ同じ) サイズの CDW が一塊りとなって動き始めることを示唆する。これを CDW の動的相関と呼べば、電場によるディピンニング機構には、不純物による不規則性に打ち勝って動的相関が成長していく過程と言える。パイエルス相としての長距離秩序は CDW の振幅 ρ_1 が担っているため、秩序相における動的な '秩序化過程' とも言う。

標記の研究課題において、以上のような CDW のディピンニング機構の解明は最も基本的な問題の一つである。その他に、運動中の CDW に伴う '狭いバンドのノイズ' や、電場を上げ下げしたり、向きを逆転したとき見られる履歴現象など興味深い問題が多い。我々は FLR 理論に基づく計算機実験を中心として、CDW の運動に伴う非線形電気伝導現象に関する研究を進めている。以下にこれまでに得られた成果を要約する。

FLR理論では、不純物を含む擬1次元導体中のCDWの基底状態、および並進運動を含めた励起状態などを、時間変化も含めた(1)式の位相因子 $\phi(r,t)$ で記述する。振幅 ρ_i の変調は高い励起エネルギー ε に伴うので考えない。 $\phi(r,t)$ を用いると、D次元のCDW系のハミルトニアンは次式で与えられる:

$$H = \int d^Dx \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + (\nabla \phi)^2 \right] + b \varepsilon_i \sum_j \cos(Qx + \phi) \delta(r - R_j) - b \varepsilon_f n_i \phi \right\} \quad (2)$$

但し、エネルギーと長さに適当なスケール変換が施されている(u はCDWの位相速度、 n_i は不純物の濃度、 $b \equiv n_i^{2/D-1}$)。時間的、空間的にゆっくり変化する $\phi(r,t)$ が問題の対象であるので、CDWを古典力学に従う連続媒質と見なせる。その弾性エネルギー $(\nabla \phi)^2$ はCDWの凝縮エネルギーそのものである(擬1次元導体としての異方性はこの項に現れるが、連続媒質近似においては、方向に依存する長さのスケール変換で等方的な系に還元できる)。もう項は弾性エネルギーと競合するピン止めポテンシャルで、 ε_i はその大きさを、 R_j は不純物の位置を表す。最終項はCDWと電場 E とのカップリングである(ε_f は E を規格化したもの)。(2)式から導かれる $\phi(r,t)$ に対する運動方程式は

$$\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \nabla^2 \phi + b \varepsilon_i \sum_j \sin(Qx + \phi) \delta(r - R_j) + b \varepsilon_f n_i, \quad (3)$$

但し、現象論的にマサリカ $-\hbar(\partial \phi / \partial t)$ を導入し、かつ $\hbar t \rightarrow t$ の変換を行っている($\hbar \equiv \hbar / u$)。(3)式の解が求まれば、CDWの分極 P とCDWが運ぶ電流 J_{CDW} は

$$P = -\frac{e}{\pi V} \int x \frac{\partial \phi}{\partial x} d^Dx, \quad J_{CDW} = \frac{e}{\pi V} \int \frac{\partial \phi}{\partial t} d^Dx \quad (4)$$

で与えられる(V は系の体積)。計算機実験では、まずモンテカルロ法で(2)式の最低エネルギー状態($E=0$ での)を求め、次にこの状態に電場 E を加えて(3)式を分子動力学法で解く。パラメータ Γ は、実験事実に基づいて、CDWの運動が過制動領域に入っているように選ぶ。また凝縮体の準巨視的な挙動をみるので温度効果は陽には考えない(実験で見られる E_T の温度変化は(2),(3)式中のパラメータの温度依存性によるものと考えられる)。この手でピン止め強度 ε_i が異なる幾つかの1, 2次元CDW系についてシミュレーションを行った。3次元CDW系が実際の擬1次元導体に対応するのだが、計算がかなり大型になる。現在、準備的な計算を進めている。

CDWが担う、規格化した非線形伝導度 $\tilde{\sigma}(x) \equiv \sigma(E)/\sigma(0)$ と規格化した電場 $x \equiv E/E_T$ でプロットした結果を図1に示す。小さい電場 E_T で鋭い立ち上がりを見せる $\sigma(E)$ がシミュレーションでも再現されている。点線が $NbSe_3$ の実験結果、実線はCDWを一つの剛体(粒子)と見なしたとき算出される $\tilde{\sigma}(x)$ である。1粒子(0次元)模型、1次元、2次元CDW系の順に実験結果に近づいており、CDWの運動においてその内部自由度のダイナミクスが重要であることを示唆している。1次元CDWについては、弱いピン止め系($\varepsilon_i \lesssim 10$)の $\tilde{\sigma}(x)$ はユニバーサルな曲線に集り、ピン止めが強くなるとそれ

り下にずれるが、この振舞いは後述する
大きい E での漸近評価と一致している。
2次元系の $\sigma(E)$ は ε_i によらず簡単な曲
線 $1 - \frac{1}{x}$ に近い一致しているが、偶然で
あるのかどうかまだ解っていない。

前述の‘動的秩序化過程’の観点から
すると、 E_T 近傍の $\sigma(E)$ の振舞いは興味
深い。Fisher³⁾ はこれを動的臨界現象
としてとらえ、 $\sigma(E)$ などの $E - E_T$ に関
する臨界指数を論じている ($E > E_T$ が秩
序相)。 $\nu_{CDW} \propto J_{CDW} \propto [(E - E_T)/E_T]^5$
とすると、 $D = 0$ (1粒子模型) で $5 = \frac{1}{2}$ 、
平均場近似では $5 = \frac{3}{2}$ 、現実の3次元系
ではその間の値になるものと予想される。
我々のこれまでの計算機実験は臨界指数
を評価する程の精度は無いが、粗く見積
ると $D = 1$ で $\frac{1}{2} < 5 < 1$ 、 $D = 2$ で $5 \sim 1$
である。実験的にも E_T 近傍では履歴現象
などが微妙に現れるため、正確な E_T 値お
よびその決定はむづかしいようである。

E が十分大きくなると、CDWは通制動を受けながらほぼ等速で並進する。不純物と衝突をくり返すが、その際位相モード (phason) を放出・吸収しながら運動量を失う。現象論的なセリツカド付であれば伝導度は $\sigma(\infty) = (e^2/\pi^2) (\varepsilon_i/E)$ となるが、 $\sigma(E)$ の $\sigma(\infty)$ からのずれはこのようなCDWの内部変動に伴う散逸のためと考えられる。実際 $\phi(r,t) = \nu_{CDW} t + \tilde{\phi}(r,t)$ とおいて(5)式をピン止めポテンシアルに図1で振動的に解くと⁴⁾

$$\delta\sigma(E) \equiv 1 - \frac{\sigma(E)}{\sigma(\infty)} \cong C \varepsilon_i^2 \varepsilon_f^{(D-4)/2} \cong C' x^{(D-4)/2} \quad (5)$$

を得る (C' は ε_i によらず定数)。 (5) 式の次元依存性は phason 状態密度の違いによる。弱い (強い) ピン止めのとき ε_f は $\varepsilon_i^{4/(4-D)}$ (ε_i) に比例するから、係数 C' は ε_i によらず ($\varepsilon_i^{D/2}$ に比例する)。図1の計算機実験の結果はこの漸近評価をよく再現している。直流電場 E に加えて交流電場を印加すると、種々の直流-交流干渉現象が見られる。超伝導 Josephson 接合で見られる ac-dc 干渉現象と類似しているが、古典論般下 LR 理論でこの現象がどう説明できるかを調べる目的で、我々はピン止めポテンシアルの高次振動項を取り込む計算を行い、その詳細を検討中である。尚、弱いピン止め領域の1次元CDW系における‘狭いバンドのノイズ’に因する計算機実験も行ったが、詳細は既に公表されている論文⁵⁾ を参照されたい。

次に、 $E < E_T$ におけるCDWのピン止め状態について調べた結果を述べる。CDWの母

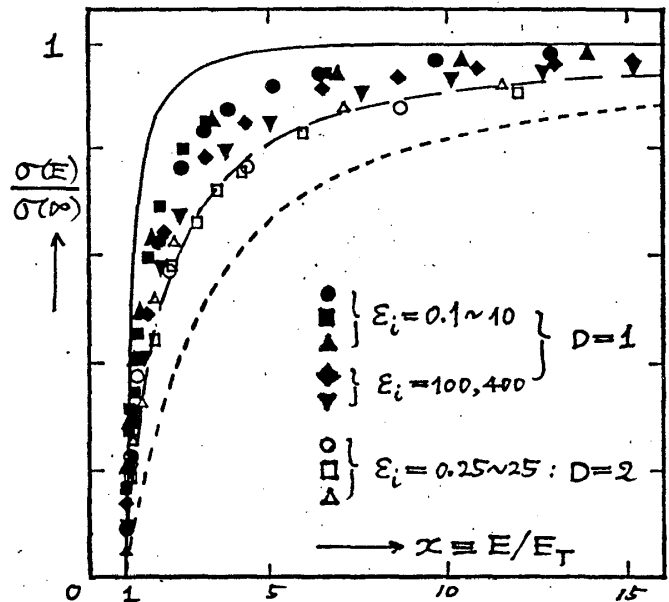


図1 CDW系の非線形電気伝導度。実線は正弦ポテンシアル中の1粒子模型の結果、破線は $1 - \frac{1}{x}$ の曲線、点線は $NbSe_3$ の実験結果。

定なピン止め配置はCDWの弾性エネルギーと不純物によるピン止めエネルギーの競合で決まる。従って、CDWのピン止め現象には、競合する相互作用が共存する不規則系に固有な性質を伴う。それはエネルギー的に何れも縮退した準安定状態が多数存在すること、関連した種々の履歴現象が期待される。我々の計算機実験においても、一つの系の $E=0$ の状態と言っても、そこへの到達の仕方によって異なる配置 $\phi(x)$ が出現する。具体的な実験と対応できる一例が $P-E$ 曲線である。試料にばうまかれた弱いピン止め不純物に加えて両端に強いピン止めセンターを置いた1次元試料において計算機実験で得られたデータを図2に示した(試料のコンタクト部分が強いピン止めセンターになっていると考えられる)。 $E=0$ の一つの安定配置に E_T 以下の電場をかけるといったものが、 E が小さいうちは $\phi(x)$ は局所的にわずか変化するだけで、分極 P もほとんど変化しない。 E がある程度大きくなると、比較的ピン止めが弱い部分が 2π の整数倍ずれた配置に止まる。隣接する、ピン止めが強い部分がこれを支えているためである。この過程がくり返されていって、 E_T の近傍では $\phi(x)$ の配置は $E=0$ のものと比べて、系のサイズにわたって大きく変えている。この変化は E_T の近傍で急激で、 P の変化率(分極率)も E_T に向けて増大している。これが‘動的秩序相’への臨界現象と見なせるが、ここでも臨界指数を決める程はデータの精度は良くない。 E_T 直前で電場を減少させ、逆向き電場の E_T まで変化させると図2の履歴ループを得る。この結果は最近 $K_{0.3}MoO_3$ で観測されたもの⁶⁾と定性的に良く一致している。

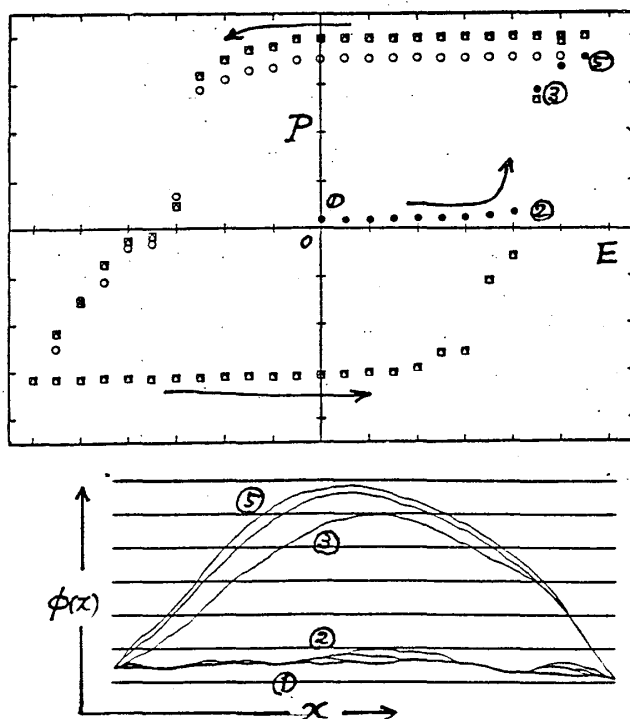


図2 1次元CDW系の $P-E$ 履歴曲線と対応する位相 $\phi(x)$ のパターン。

以上のより、 FLR 理論に基づく計算機実験は観測される実験事実を定性的に良く再現していると言える。今後は、定量的な比較と同時に、現象の裏に秘む、基本的メカニズムを明らかにしていきたい。

- 1) "Charge Density Waves in Solids" Budapest会議の会議録 (Lect. Note in Phys. Vol. 217).
- 2) H. Fukuyama & P. A. Lee; Phys. Rev. B17, 535 ('78), P. A. Lee & T. M. Rice; ibid. B19, 3970 ('79)
- 3) D. S. Fisher; Phys. Rev. B31, 1396 ('85). 4) L. Sneddon et al; Phys. Rev. Lett. 59, 292 ('82)
- 5) H. Matsukawa & H. T.; Solid State Commun. 52, 283 ('84) 6) L. Mihaly et al; preprint.